Bound State due to the s-d Exchange Interaction

芳　田　　　奎（東大物性研）

（3月20日受理）

まえがき

本日電気試験所の近藤淳氏が "Bound State in Metals due to a Fluctuating Perturbation" と題する一文を本誌に投稿されたことを、近藤氏がその copy を私あて送つてこられたことによつて知りました。早速その内容を一読いたしましたところ、そこで述べられている内容は私が昨年11月に小論文にまとめたものと同じであると思います。この小論文はどこにもまだ発表いたしておりませんが、その preprint は1月22日物性研での土曜輪講のあとで近藤氏に手渡しました。このような事情で私の小論文（英文）の日本語訳を以下に掲載する次才です。

近藤[1]が3次の摂動理論で不純物スピンによる伝導電子の散乱に log の特異性を見出して以来、多くの研究[2]−[6]がこの log の特異性の源を明かにするためになされてきた。長岡[3]は相互作用が反強磁性的のばあいには、摂動の取扱いがある限界温度以下で break down すること及び Fermi 面の近くに準束縛状態が現れるであろうということを指摘した。他方芳田と興地[5]は局在スピンの大きさと伝導電子の偏極を摂動の方法で計算し、反強磁性的相互作用の場合には摂動の取扱いが局在スピンの大きさに対してある限界温度以下で不合理な結果に導くこと、すなわち局在スピンの大きさが温度減少と共に減少しゼロを通つて負になることを示した。彼等はこの結果にもとずいて、摂動計算がこの温度以下で break down するという長岡の主張を確認し、さらに局在モーメントがこの温度以下で消えてしまうと推定した。この小論文の目的は簡単なモデル・ハミルドニアンに基いて、束縛状態がs－d交換相互作用のために実際に出現することを示すことである。

芳田　奎

伝導電子と１局在スピンからなる系のハミルトニアンは

$$H=\Sigma_{k\sigma}\epsilon_k a^*_{k\sigma}a_{k\sigma}-\frac{J}{2N}\sum_{kk'}\{(a^*_{k'\uparrow}a_{k\uparrow}-a^*_{k'\downarrow}a_{k\downarrow})S_z$$
$$+a^*_{k'\uparrow}a_{k\downarrow}S_-+a^*_{k'\downarrow}a_{k\uparrow}S_+\}, \tag{1}$$

のように現わされる。ここに $a^*_{k\sigma}$ と $a_{k\sigma}$ は通常の波数ベクトル k とスピン σ をもつ伝導電子を作つたりこわしたりするオペレーターで、ϵ_k は Fermi エネルギーから測つたバンドのエネルギーである。また S_z, $S_\pm$ は局在スピンの成分である。

このハミルトニアンにおいて Fermi 準位以下の電子は s－d 相互作用によつて影響をうけない、即ち方程式(1)の才２項の和は Fermi 面より高い状態について行うというように仮定してみよう。このようなハミルトニアンの簡単化は超伝導理論における Cooper pairs の形成を説明するために Cooper[7] によつて非常な成功をもつて用いられた方法で、多分現在の場合即ち局在スピンの動力学的性格を考慮する場合にもまた正当付けることが出来よう。同じ簡単化は現ハミルトニアンに対して別の目的のために近藤[8]によつても用いられた。このような簡単化を行うとき、我々は k_F より大きい波数ベクトルをもつ電子の固有状態を考えることが出来る。

truncated・ハミルトニアン に対する電子の固有状態は平面波の線型結合によつて次のように表わすことが出来る。

$$\psi=\sum_{k>k_F}\{(\Gamma^\alpha_{k\uparrow}a^*_{k\uparrow}+\Gamma^\alpha_{k\downarrow}a^*_{k\downarrow})\psi_V\alpha$$
$$+(\Gamma^\beta_{k\uparrow}a^*_{k\uparrow}+\Gamma^\beta_{k\downarrow}a^*_{k\downarrow})\psi_V\beta\}, \tag{2}$$

ここに ψ_V は Fermi の海に対する波動函数であり、α と β は、夫々 $\frac{1}{2}$ の大きさを仮定して局在スピンの上向き及び下向きのスピン状態を意味する。

波動函数(2)を

$$H\psi=E\psi, \tag{3}$$

の中に代入すれば、Γ_k とエネルギー固有値を決める次の４つの方程式がえら

れる。すなわち

$$\Gamma^{\alpha}_{k\uparrow}(\varepsilon_k - E) - \frac{J}{4N}\Sigma_{k'}\Gamma^{\alpha}_{k'\uparrow} = 0, \tag{4a}$$

$$\Gamma^{\alpha}_{k\downarrow}(\varepsilon_k - E) - \frac{J}{4N}\Sigma_{k'}\Gamma^{\alpha}_{k'\downarrow} - \frac{J}{2N}\Sigma_{k'}\Gamma^{\beta}_{k'\uparrow} = 0, \tag{4b}$$

$$\Gamma^{\beta}_{k\uparrow}(\varepsilon_k - E) + \frac{J}{4N}\Sigma_{k'}\Gamma^{\beta}_{k'\uparrow} - \frac{J}{2N}\Sigma_{k'}\Gamma^{\alpha}_{k'\downarrow} = 0, \tag{4c}$$

$$\Gamma^{\beta}_{k\downarrow}(\varepsilon_k - E) - \frac{J}{4N}\Sigma_{k'}\Gamma^{\beta}_{k'\downarrow} = 0 \tag{4d}$$

これらの4つの方程式から、3重状態及び1重状態に対応して次の2つの永年方程式がえられる。

$$1 - \frac{J}{4N}\Sigma_k \frac{1}{\varepsilon_k - E} = 0, \tag{5}$$

$$1 + \frac{3J}{4N}\Sigma_k \frac{1}{\varepsilon_k - E} = 0. \tag{6}$$

方程式(5)は J ＞0の場合には Fermi レベルより

$$E = -D/(e^{\frac{4N}{\rho J}} - 1) \sim -De^{-\frac{4N}{\rho J}} \tag{7}$$

だけ低い処に3重項の束縛状態を与えることが簡単に示される。また J ＜0のときは式(6)によつて singlet の束縛状態が出てくる。このエネルギーは

$$E = -D/(e^{\frac{4N}{3\rho|J|}} - 1) \sim -De^{-\frac{4N}{3\rho|J|}} \tag{8}$$

となる。ここに ρ と D は Fermi 面近くの状態密度とバンド巾である。これらの bound states の固有函数はそれぞれ

$$\psi_t = \text{const.}\ \Sigma_{k>k_F}\frac{1}{\varepsilon_k - E}a^*_{k\uparrow}\alpha\psi_v, \tag{9}$$

芳田　奎

$$\psi_S = \text{const.}\ \Sigma_{k>k_F} \frac{1}{\epsilon_k - E} (a^*_{k\downarrow}\alpha - a^*_{k\uparrow}\beta)\psi_V, \qquad (10)$$

となり、これら波動函数の空間的拡りは、不純物原子から遠い所で $\cos k_F r/r^2$ で与えられる。bound state は $kT_C \sim |E|$ で与えられる。bound state は $kT_C \sim |E|$ の程度の温度で消えてしまう。triplet bound state では局在モーメントは勿論残る。従つてこの状態は他の電子によつて影響をうける。しかし、singlet bound state に対しては局在スピンの各成分が消えてしまう。従つてこの bound state は他の電子の存在によつて影響されないで生残るであろう。それ故に反強磁的相互作用の場合には、局在スピンモーメントも伝導電子のスピン偏極も T_C 以下で singlet bound state の出現と共に消えてしまうであろう。この結果は摂動計算によつてえられた推論[5]と一致している。かようにして $J<0$ の場合の T_C 以下での摂動計算が break down することはスピン・モーメントの保存が破れるという事実によるということが出来る。

現在の計算は容易に $\frac{1}{2}$ より大きい局在スピンの場合にも拡張することが出来る。例えば $S=1$ の場合2つの伝導電子が局在スピンと結合して反強磁性相互作用に対して singlet bound state を作ることが期待される。s-d 相互作用に対する現在のモデルは正確ではないのでこの基礎の仮定を除くことによつて改良されねばならない。しかし乍らここに得られた結果は物理的には正しいと予想される。

この問題については守谷、三輪、興地の3氏から有益な議論をいただいたことを附記したい。

文　　献

1 J. Kondo, Prog. Theor. phys. (Kyoto) 32, 37 (1964).
2 H. Suhl, phys. Rev. 138 A515 (1965). physics, in press.
3 Y. Nagaoka, phys. Rev. 138, A1112 (1965)
4 A. A. Abrikosov, ZETF, 48, 990 (1965)

Bound State due to the s-d
5 K. Yosida and A. Okiji, prog. Theor. Phys. (Kyoto) 34, (1965)
6 H.Miwa, Prog. Theor. Phys. (Kyot) 34, (1965) in press.
7 L.N.Cooper, Phys. Rev. 104, 1189 (1956).
8 J.Kondo, Prog, Theor. Phys. (Kyoto) 34, 204 (1965).

以　上

あとがき

この小論文ではHamiltonianをelectron − electron 相互作用のみを残すようにtruncateした。しかしこれはelectron の代りにhole で置き換えても同じで、この場合には裏返えしにしてhole − hole相互作用をとり入れたことになる。

Hamiltonianをこのようにtruncateしたことは、これを変分法の立場で云えばfull Hamiltonianをとる代りに変分函数として

$$\Psi = \Sigma_{k>k_F}\, \Gamma_k\, (a^*_{k\uparrow}\beta - a^*_{k\uparrow}\alpha)\, \Pi_{k<k_F}\, a^*_{k\uparrow} a^*_{k\downarrow} \Psi_{vacuum}$$

をとつたのと同じであることは云うを俟たない。近藤氏は上式で $a^*_{k\uparrow} a^*_{k\downarrow}$ の代りに平面波の線型結合をとり $a^*_{n\uparrow} a^*_{n\downarrow}$ とおき a_n の作り方を更に変分パラメタとして導入しているが、この効果は現在のところ何もえられていないし現状は我々の結果からは一歩も出ていないと云わねばならない。